

室温・単一有機分子磁気接合の創成

山田 豊和¹, 山岸 祐平¹, 北岡幸恵², 中村浩次²
(千葉大院融合¹, 三重大工²)

Engineering of 300 K single organic molecular magnetic junction
Toyo Kazu Yamada¹, Yuhei Yamagishi¹, Yukie Kitaoka², Kohji Nakamura²
(Chiba Univ.¹, Mie Univ.²)

単一分子の π 電子と磁性金属の3d電子スピン状態の混成の理解と制御は新たなナノ分子磁気デバイスの発展に必要不可欠である^{1),2),3),4)}。単一分子に関する研究は主として極低温環境下で行われてきた。温度を上げると単一分子が熱拡散するためである。しかし、これでは実用的なデバイスとならない。

我々は、室温でも壊れることない単一分子磁気接合を実現するため、理論計算による推測と走査トンネル顕微鏡 (STM) 実験による実証を組み合わせ研究を行ってきた。種々の素材の中で本研究では Fe(001) 基板に注目した。計算より、室温で有機分子の熱拡散が確認されている Ag(001) 基板に比べ、分子の吸着エネルギー及び拡散障壁が4倍以上の高いと分かったからである。

単一有機分子が室温でも熱拡散せずに安定な接合を作成するかを実証するために、本研究では走査トンネル顕微鏡 (STM) を使用した。試料作製および全ての測定は超高真空中、300Kで行った。単一有機分子として π 電子系・メタルフリーのフタロシアニン分子 (H2Pc) を使用した。昇華精製した分子を坩堝にいれ超高真空中で基板に吸着した。原子レベルで平坦かつ不純物が1%以下の Fe(001) 基板を作成するためにウイスカ単結晶を化学気相成長させた。超高真空中、870Kでアルゴンスパッタを行うことで清浄かつ平坦な基板表面を得た。原子像から結晶方向を確認した。0.2分子膜分を Fe(001) に室温で吸着し STM 観察した。室温であっても単一分子として確認できた。STM 連続観察を行い分子は熱拡散しないことを確認した。さらに STM 探針によるマニピュレーションを試みたが成功しなかった。非常に強く基板に結合していることを確認した。⁵⁾

Fe(001)-H2Pc 間の強結合は、基板の3d軌道と分子の π 軌道の重なり起因する。STM分光法による dI/dV 曲線測定およびトンネル確率関数規格化法を用いて、Fe(001) 基板上的単一有機分子の電子状態密度の再現に成功した。メタルフリーにもかかわらず分子の中心近傍が強く基板と相互作用する。フェルミ準位近傍に4つの電子状態ピークを確認した。理論計算はこの4つのピークを再現し、磁性金属分子界面での電子結合のメカニズムを解明した。少数スピン状態側では鉄3d軌道とLUMOが相互作用しフリー状態よりエネルギー位置はシフトするが、多数スピン状態側では相互作用しないためピーク位置はフリー状態と同じになる。高スピン偏極した3dとLUMO(またはHOMO)がうまく重なるような分子と基板を選択すれば、人工的にスピン分極させハーフメタルのような界面形成も可能となる。

参考文献

- 1) Y. Yamagishi, S. Nakashima, K. Oiso and T. K. Yamada, Nanotechnology, 24 巻, pp.395704, 2013 年.
- 2) A. Bagrets, S. Schmaus, T.K. Yamada, W. Wulfhekel, et al., Nano Letters, 12 巻, pp.5131, 2012 年.
- 3) T. Miyamachi, T.K. Yamada, W. Wulfhekel, et al. Nature Communications, 3 巻, pp.938, 2012 年.
- 4) S. Schmaus, T.K. Yamada, W. Wulfhekel, et al., Nature Nanotechnology, 6 巻, pp.185, 2011 年.
- 5) T.K. Yamada, Y. Yamagishi, Y. Kitaoka, and K. Nakamura, submitted.